

O Zagrebačkim indeksima⁺

KUI – 25/2010

Prispjelo 28. svibnja 2010.

Prihvaćeno 17. rujna 2010.

N. Trinajstić,^{a} S. Nikolić,^a A. Miličević^b i I. Gutman^c*^a Institut Rugjer Bošković, Bijenička 54, HR–10 001 Zagreb, Hrvatska^b Institut za medicinska istraživanja i medicinu rada, Ksaverska cesta 2, HR–10 1001 Zagreb, Hrvatska^c Prirodoslovno-matematički fakultet, 34 000 Kragujevac, Srbija

Prikazani su izvorni Zagrebački indeksi i neke njihove inačice kao što su modificirani Zagrebački indeksi, varijabilni Zagrebački indeksi, reformulirani izvorni Zagrebački indeksi, reformulirani modificirani Zagrebački indeksi, Zagrebački indeksi kao indeksi kompleksnosti, opći Zagrebački indeksi, Zagrebački indeksi heterocikličkih sustava. Navedeno je nekoliko zanimljivih svojstava Zagrebačkih indeksa ovisnih o strukturi molekularnih (kemijskih) grafova. Dani su Zagrebački indeksi za linijske grafove, kao i njihova veza s određenim šetnjama po grafu. Razmatran je odnos Zagrebačkih indeksa prema nekima od najranijih molekularnih deskriptora kao što su Plattov indeks (iz godine 1947.) i Gordon-Scantleburyjev indeks (iz godine 1964.). Prikazani su također i novi molekularni deskriptori nazvani Zagrebački ko-indeksi, koji su svojevrsni anti-zagrebački indeksi. Navedene su formule za računanje izvornih Zagrebačkih indeksa za neke homologne klase molekula.

Ključne riječi: *Izvorni Zagrebački indeksi, inačice Zagrebačkih indeksa, svojstva Zagrebačkih indeksa, Zagrebačke matrice, molekularni (kemijski) grafovi, kemijska teorija grafova, analitičke formule za računanje Zagrebačkih indeksa*

Uvod

Formalno su se Zagrebački indeksi prvi puta pojavili prije 38 godina u aproksimativnoj formuli za ukupnu π -elektronsku energiju konjugiranih molekula.¹ Na slici 1 su autori toga prvoga članka o Zagrebačkim indeksima, a na slici 2 je prikazana prva stranica članka.

Kao mjera razgranatosti neke kemijske strukture, Zagrebački indeksi su prvi put upotrijebljeni tri godine poslije, kada je razmatrana razgranatost acikličkih poliena.² Zagrebački indeksi su prvi put tako nazvani u članku *Balabana i suradnika*,³ ali se u literaturi nazivaju i drugačije.⁴ Točnije, u radu *Balabana i suradnika*³ govori se o indeksima Zagrebačke grupe (engleski: *Zagreb Group indices*), a kao njihov izvor navode se radovi ovdje navedeni kao referencije 1 i 2. Pod Zagrebačkom grupom očito se mislilo na skupinu (tada mladih) znanstvenika u Grupi za teorijsku kemiju Instituta Rugjer Bošković, koji su u to vrijeme započinjali pothvat iz kojega će za koju godinu nastati *Kemijska teorija grafova*.

S vremenom su se pojavile i inačice Zagrebačkih indeksa,⁵ a referirani su u većini monografija, koje donose prikaze molekularnih deskriptora i njihovu primjenu u modeliranju odnosa strukture, svojstava i aktivnosti različitih klasa molekula (QSPR, QSAR).^{6–10} Zagrebački indeksi su također uključeni u brojne računalne programe za rutinsko računanje molekularnih deskriptora.¹¹

Matematička svojstva Zagrebačkih indeksa detaljno su razmatrana, osobito posljednjih godina.^{12–15} Godine 2003. objavljena su o tome (ne manje od) tri znanstvena rada, a sljedećih godina, zaključno s godinom 2009., (ne manje od)

8, 3, 4, 9, 6 i 9 radova. U vrijeme pisanja ovog članka, ove godine su već objavljena četiri rada, a nemali broj ih je u tisku ili na recenziji. Vrijedi spomenuti autore koji su se u posljednjih nekoliko godina bavili matematičkim svojstvima i primjenom Zagrebačkih indeksa. Osim autora ovoga članka to su: A. R. Ashrafi (Iran), I. Baučić (Hrvatska), A. Behtoei (Iran), S. H. Bertz (SAD), R. S. Chen (Kina), S. Chen (Kina), T. Chen (Kina), T. C. E. Cheng (Kina), T. Došlić (Hrvatska), K. C. Das (Koreja), H. Deng (Kina), G. H. Fath-Tabar (Iran), Y. Feng (Kina), B. Furtula (Srbija), A. Graovac (Hrvatska), Y. Guo (Kina), A. Hamzeh (Iran), P. Hansen (Kanada), B. Horoldagva (Mongolija), X. Hu (Kina), H. Hua (Kina), Z. Huang (Kina), A. Ilić (Srbija), M. Jannesari (Iran), D. Janežič (Slovenija), G. Kovačević (Hrvatska), R. Lang (Kina), S. G. Lee (Koreja), S. Li (Kina), X. Li (Kina), B. Liu (Kina), H. Liu (Kina), M. Liu (Kina), A. Miličević (Hrvatska), S. Moradi (Iran), S. M. Rajtmajer (Hrvatska), D. Stevanović (Srbija), L. Sun (Kina), B. Taeri (Iran), I. M. Tolić-Nørrelykke (Hrvatska), A. A. Toropov (Uzbekistan), A. P. Toropova (Uzbekistan), D. Vukičević (Hrvatska), W. Wang (Kina), S. Wei (Kina), F. Xia (Kina), Z. Yan (Kina), Z. Yarahmadi (Iran), Z. You (Kina), H. Zhang (Kina), S. Zhang (Kina), B. Zhou (Kina), H. Zhou (Kina), uz mogućnost da su neka imena izostavljena. Otuda slijedi da su i nakon 38 godina Zagrebački indeksi i njihove inačice još uvijek zanimljivi istraživačima u području matematičke kemije i dizajna aktivnih molekula. Štoviše Zagrebački su indeksi ušli u kemijski žargon tako da se često i ne navode izvorne publikacije u kojima su definirani.¹⁶ U članku ćemo rabiti nazivlje iz kemijske teorije grafova.^{17,18}

Izvorni Zagrebački indeksi

Zagrebački su indeksi M_1 i M_2 nekoga grafa G definirani na sljedeći način:^{1,2}

⁺ U povodu 60-te obljetnice Instituta Rugjer Bošković

* Autor za korespondenciju: Akademik Nenad Trinajstić, trina@irb.hr



Slika 1 – Autori prvoga članka o Zagrebačkim indeksima Ivan Gutman i Nenad Trinajstić 38 godina poslije njegove objave

Fig. 1 – Authors of the first report on the Zagreb indices Ivan Gutman and Nenad Trinajstić 38 years after its publication

Volume 17, number 4

CHEMICAL PHYSICS LETTERS

15 December 1972

GRAPH THEORY AND MOLECULAR ORBITALS*. TOTAL π -ELECTRON ENERGY OF ALTERNANT HYDROCARBONS

I. GUTMAN and N. TRINAJSTIĆ

Institute Ruđer Bošković, P.O. Box 1016, 41001 Zagreb, Croatia, Yugoslavia

Received 3 October 1972

The dependence of the Hückel total π -electron energy on the molecular topology is shown. General rules governing the structural dependence of the π -electron energy in conjugated molecules are derived.

The total π -electron energy (E_π) is a very important property of conjugated molecules and it can in a proper way be related to their thermodynamic stability [2]. Since the Hückel hamiltonian is completely defined by the molecular structure ("topology") [3] it is clear that there must be a unique relation between E_π and the molecular topology. In the past one has tried to solve this problem using algebraic methods [4–6], perturbation theory [7–11] and semi-empirical formulae [12–16].

The Hückel hamiltonian is defined as

$$H = \alpha I + \beta A, \quad (1)$$

where I is a unit matrix, α and β are the Coulomb and resonance integrals and A is the adjacency matrix of the molecule [1, 17, 18]. If x_1, x_2, \dots, x_N are the eigenvalues of the matrix A ($x_i \neq x_j$ if $i \neq j$), the total π -electron energy (in β units) is given by

$$E_\pi = 2 \sum_{i=1}^{N/2} x_i. \quad (2)$$

In this work we will consider only alternant hydrocarbons for which the "pairing theorem" is valid, i.e., if x is an eigenvalue of A then $-x$ is also an eigenvalue. Therefore

$$E_\pi = \sum_{i=1}^N |x_i|. \quad (3)$$

* Previous results can be found in ref. [1].

The coefficients a_j of the characteristic polynomial of the graph G corresponding to the molecule,

$$P_G(x) = \det |xI - A| = \sum_{j=0}^N a_j x^{N-j}, \quad (4)$$

can be evaluated by inspection of the molecular topology using the Sachs theorem [19]. Details can be found in ref. [18]. Another method for the enumeration of a_j was recently developed by Hosoya [20]. Simple expressions can be derived [17] for a_1 , a_2 and a_3 , i.e.,

$$a_1 = 0, \quad a_2 = -\nu, \quad a_3 = -2n_3, \quad (5a)$$

where ν is the number of bonds and n_3 is the number of 3-membered rings in the molecule. For alternant hydrocarbons it is also valid,

$$a_j = 0 \quad \text{for odd } j. \quad (5b)$$

The generalisation of eqs. (5) for arbitrary a_j is far from being simple and will be discussed elsewhere [21]. Let S_n be defined as

$$S_n = \sum_{i=1}^N x_i^n. \quad (6)$$

It is also known [17] that

$$a_1 = -S_1, \quad a_2 = -\frac{1}{2}S_2, \quad a_3 = -\frac{1}{6}S_3. \quad (7)$$

Assuming that $S_1 = 0$, which is always true, the following relation holds (see appendix):

535

Slika 2 – Naslovna stranica prvoga članka o Zagrebačkim indeksima

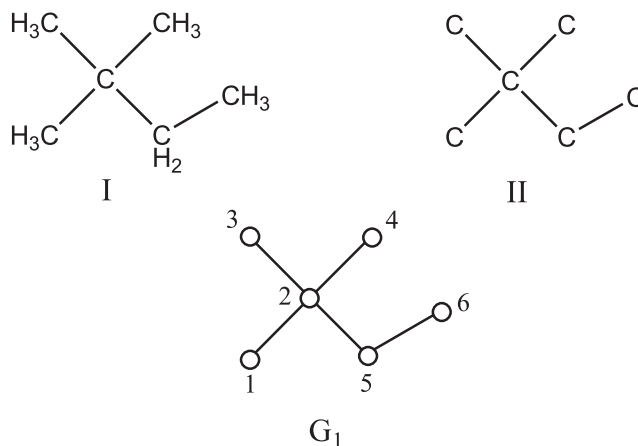
Fig. 2 – Front page of the first publication on Zagreb indices

$$M_1 = \sum_{i \in V} d(i)d(i) \quad (1)$$

$$M_2 = \sum_{ij \in E} d(i)d(j) \quad (2)$$

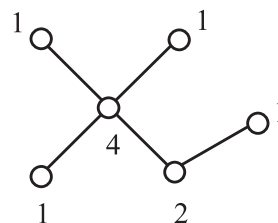
gdje je $d(i)$ valencija čvora i , $d(i)d(j)$ je težina grane $i-j$, V skup čvorova, a E je skup grana grafa G . Valencija čvora je dana brojem grana koje izlaze iz čvora. Npr. vrijednosti M_1 i M_2 za molekularni graf G_1 , koji predstavlja ugljikov kostur 2,2-dimetilbutana (vidi sliku 3) su 24 i 22. Valencije čvorova u grafu G_1 prikazane su u slici 4.

U suvremenoj matematičko-kemijskoj literaturi M_1 se naziva prvi Zagrebački indeks (engleski: first Zagreb index), a M_2 drugi Zagrebački indeks (engleski: second Zagreb index).



Slika 3 – 2,2-Dimetilbutan (I), njegov ugljikov kostur (II) i odgovarajući molekularni graf G_1 s numeriranim čvorovima

Fig. 3 – 2,2-Dimethylbutane (I), its carbon skeleton (II) and the corresponding molecular graph G_1 with labelled vertices



Slika 4 – Valencija čvorova u grafu G_1

Fig. 4 – The vertex-valencies in graph G_1

Zagrebački se indeksi mogu definirati i pomoću dijagonalnih elemenata kvadrirane matrice susjedstva čvorova cA :¹⁹

$$M_1 = \sum_{i \in V} ({}^cA^2)_{ii} \quad (3)$$

$$M_2 = \sum_{ij \in E} ({}^cA^2)_{ij} \quad (4)$$

Uporabu izraza (3) i (4) možemo ilustrirati na grafu G_1 .

Matrica susjedstva cA čvorova grafa G_1 je

0	1	0	0	0	0
1	0	1	1	1	0
0	1	0	0	0	0
0	1	0	0	0	0
0	1	0	0	0	1
0	0	0	0	1	0

a matrica ${}^cA^2$ je

1	0	1	1	1	0
0	4	0	0	0	1
1	0	1	1	1	0
1	0	1	1	1	0
1	0	1	1	2	0
0	1	0	0	0	1

Dijagonalni elementi matrice ${}^cA^2$ su identični valencijama čvorova u grafu G_1 :

$$({}^cA^2)_{ii} = d(i) \quad (5)$$

pa su dobivene vrijednosti M_1 i M_2 identične prethodno dobivenim vrijednostima.

Prva dva članka o izvornim Zagrebačkim indeksima^{1,2} umjereno se citiraju. Prema podatcima na ISI Web of Science od 24. ožujka 2010. referencije 1 i 2 citirane su do toga datuma 189 i 251 puta.

Modificirani Zagrebački indeksi

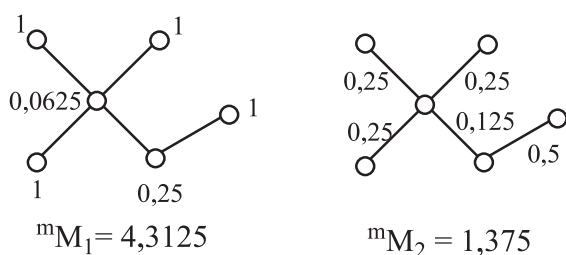
Modificirani Zagrebački indeksi uvedeni su da bi se istaklo da su doprinosi vanjskih atoma u molekuli veći od doprinosa unutarnjih atoma u molekuli i tako odrazili činjenicu da su vanjski atomi znatno više izloženi dodiru s površinom drugih molekula od unutarnjih atoma te da imaju odlučujući utjecaj na svojstva molekula. Modificirani Zagrebački indeksi mM_1 i mM_2 definirani su ovako:⁵

$${}^mM_1 = \sum_{i \in V} 1/d(i)d(i) \quad (6)$$

$${}^mM_2 = \sum_{ij \in E} 1/d(i)d(j) \quad (7)$$

Vrijedi istaknuti da je formula za mM_2 indeks identična formuli Bonchevoga indeksa označenoga s 1ON , koji je on nazvao sveukupni indeks prvoga reda.²⁰

Na slici 5 dajemo vrijednosti mM_1 i mM_2 indeksa za graf G_1 .



Slika 5 – Težine čvorova i grana u grafu G_1 koji se rabe za računanje modificiranih Zagrebačkih indeksa

Fig. 5 – Vertex-weights and edge-weights in the graph G_1 used for computing the modified Zagreb indices

Varijabilni Zagrebački indeksi

Varijabilni Zagrebački indeksi vM_1 i vM_2 definirani su izrazima:²¹

$${}^vM_1 = \sum_{i \in V} [d(i) d(i)]^v \quad (8)$$

$${}^vM_2 = \sum_{ij \in E} [d(i) d(j)]^v \quad (9)$$

gdje je v varijabla, čija se optimalna vrijednost određuje posebno za svako svojstvo koje se razmatra.

Očigledno je da je vM_1 za $v = 1$ jednak izvornome prvome Zagrebačkome indeksu M_1 , a za $v = -1$ prvome modificiranome Zagrebačkome indeksu mM_1 . Indeks vM_2 za $v = 1$ jednak je izvornome drugome Zagrebačkome indeksu M_2 , za $v = -1$ drugome modificiranome Zagrebačkome indeksu mM_2 , a za $v = -1/2$ Randićevu indeksu povezanosti.^{22,23} Miličević i Nikolić su ustanovili da su varijabilni Zagrebački indeksi pogodni za predviđanje vrelišta nižih alkana.²¹

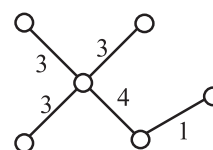
Reformulirani izvorni Zagrebački indeksi

Zagrebački indeksi mogu se reformulirati tako da se u relacijama (1) i (2) valencije čvorova zamijene valencijama grana. Valencija d_g neke grane g jednaka je broju susjednih grana. Reformulirani izvorni Zagrebački indeksi EM_1 i EM_2 definirani su ovim izrazima:²⁴

$$EM_1 = \sum_{i \in E} d_g(i) d_g(i) \quad (10)$$

$$EM_2 = \sum_{ij \in E} d_g(i) d_g(j) \quad (11)$$

Na slici 6 dane su valencije grana u grafu G_1 . Pomoću njih dobijemo da su vrijednosti indeksa EM_1 i EM_2 grafa G_1 44 i 67.



Slika 6 – Valencije grana u grafu G_1

Fig. 6 – The edge-valencies in graph G_1

Reformulirani se Zagrebački indeksi također mogu definirati i pomoću dijagonalnih elemenata kvadrirane matrice susjedstva grana gA :

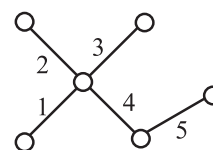
$$EM_1 = \sum_{i \in E} ({}^gA^2)_{ii} \quad (12)$$

$$EM_2 = \sum_{ij \in E} ({}^gA^2)_{ii} ({}^gA^2)_{jj} \quad (13)$$

Relacije (12) i (13) su povezane s relacijama (10) i (11) preko jednakosti:

$$d_g(i) = ({}^gA^2)_{ii} \quad (14)$$

Relacija (14) se lako provjeri pomoću kvadrirane matrice susjedstva grana. Na slici 7 prikazan je graf G_1 s numeriranim granama.



Slika 7 – Graf G_1 s numeriranim granama

Fig. 7 – Graph G_1 with labelled edges

Matrica susjedstva gA grana grafa G_1 je

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

a matrica ${}^g\mathbf{A}^2$ je

$$\begin{pmatrix} 3 & 2 & 2 & 2 & 1 \\ 2 & 3 & 2 & 2 & 1 \\ 2 & 2 & 3 & 2 & 1 \\ 2 & 2 & 2 & 4 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Reformulirani modificirani Zagrebački indeksi

Modificirani Zagrebački indeksi se mogu reformulirati tako da se u relacije (10) i (11) umjesto d_g uvede $1/d_g$:²⁴

$${}^m\text{EM}_1 = \sum_{i \in V} 1/d_g(i) d_g(i) = \sum_{i \in E} [d_g(i) d_g(i)]^{-1} \quad (15)$$

$${}^m\text{EM}_2 = \sum_{ij \in E} 1/d_g(i) d_g(j) = \sum_{ij \in E} [d_g(i) d_g(j)]^{-1} \quad (16)$$

Vrijednosti indeksa ${}^m\text{EM}_1$ i ${}^m\text{EM}_2$ za molekularni graf G_1 su 1,3958 i 0,8333.

Zagrebački indeksi kao indeksi kompleksnosti

Zagrebački indeksi kompleksnosti TM_1 i TM_2 definirani su ovako:^{5,25}

$$\text{TM}_1 = \sum_s \sum_{i \in E} d(i) d(i) (s) = \sum_s M_1(s) \quad (17)$$

$$\text{TM}_2 = \sum_s \sum_{ij \in E} d(i) d(j) (s) = \sum_s M_2(s) \quad (18)$$

Zbroj \sum_s u izrazima (17) i (18) ide preko svih podgrafova s , a zbrojevi $\sum_{i \in V}$ i $\sum_{ij \in V}$ idu preko valencija čvorova koje su dane u izvornome grafu. Oba indeksa TM_1 i TM_2 predstavljaju zbroj svih indeksa M_1 i M_2 koji se računaju za svaki podgraf s . To je prikazano na slici 8 za graf G_2 koji predstavlja ugljikov kostur butana.

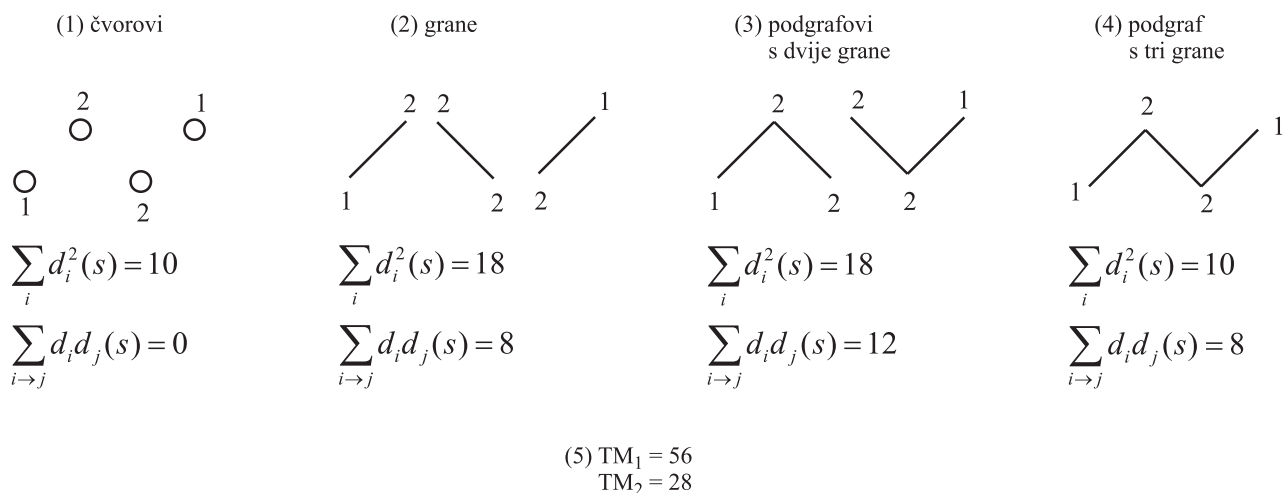
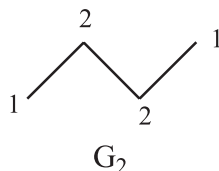
Indeksi TM_1 i TM_2 su nastali na temelju Bonchevoga topološkoga indeksa kompleksnosti, kojega je autor označio s TC i koji je definiran kao zbroj valencija čvorova u svim podgrafovima:²⁶

$$\text{TC} = \sum_s \sum_{i \in V} d(i)(s) \quad (19)$$

Na slici 9 izračunan je indeks TC za graf ugljikova kostura butana. Treba uočiti da su valencije čvorova u podgrafovima jednake valencijama čvorova u izvornome grafu.

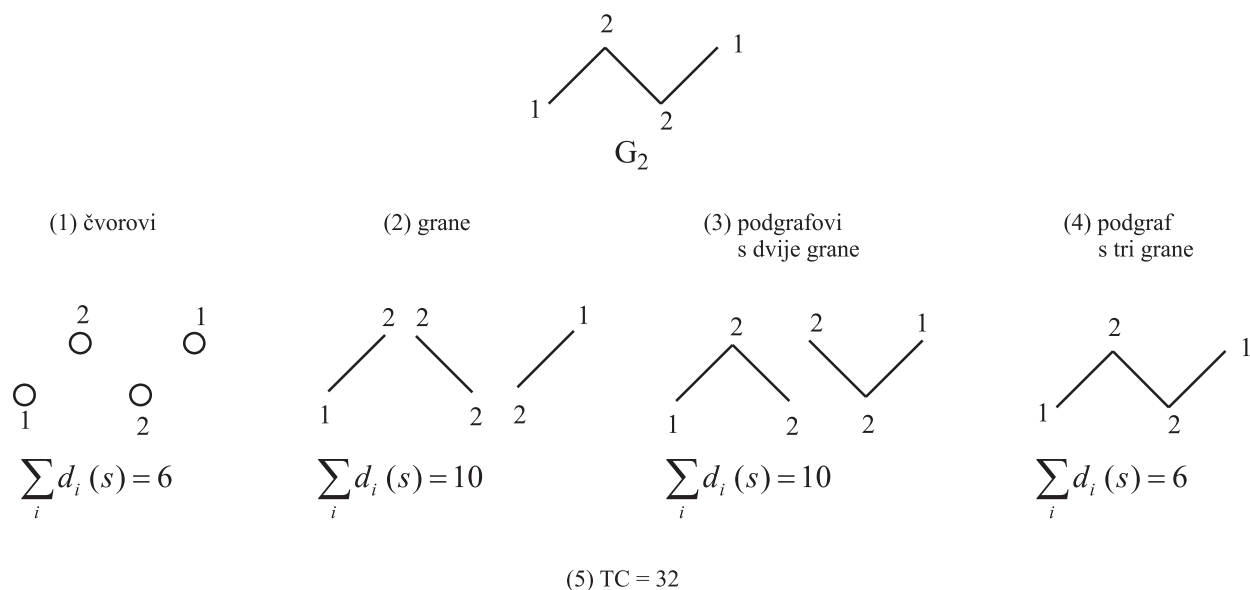
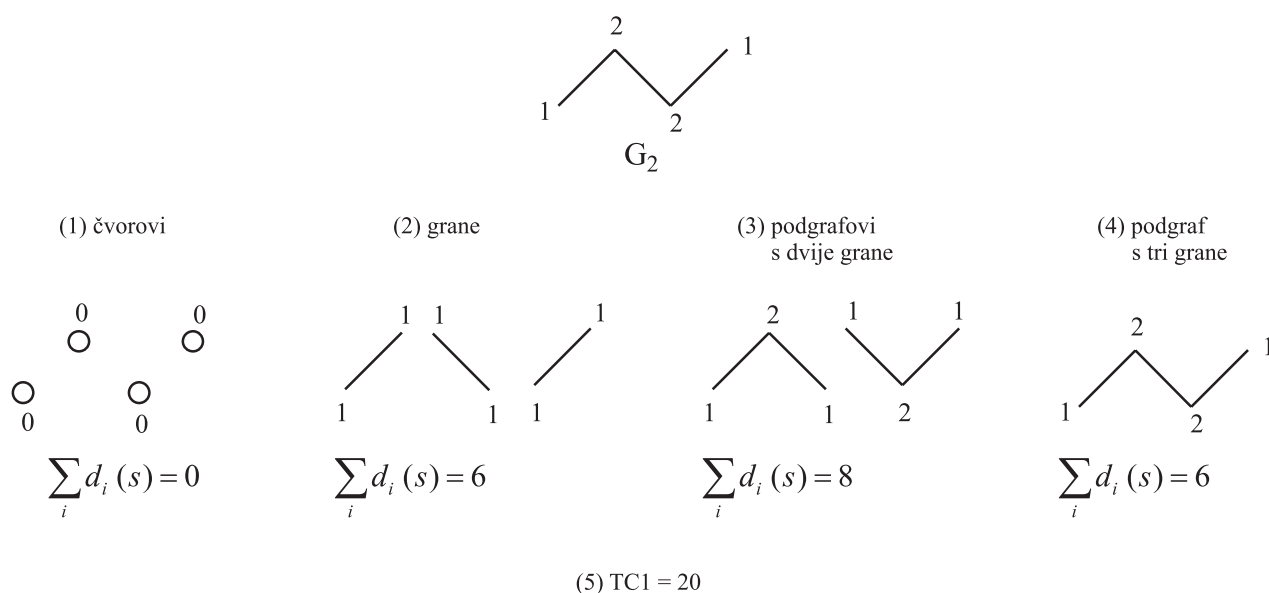
Bonchev je također predložio i inačicu svoga indeksa, koju je označio s TC1. Indeks TC1 se razlikuje od indeksa TC po tome što se u njegovu računanju rabe valencije čvorova kakve su u podgrafovima. To je prikazano na slici 10. Valja uočiti da je uvijek $\text{TC} > \text{TC1}$, osim u slučaju grafa s jednim čvorom, kada je $\text{TC} = \text{TC1} = 0$.

Naravno da je ta Bonchevova ideja prihvaćena u slučaju indeksa TM_1 i TM_2 , pa su uvedena još dva Zagrebačka indeksa kompleksnosti ${}^*\text{TM}_1$ i ${}^*\text{TM}_2$. Računanje indeksa ${}^*\text{TM}_1$ i ${}^*\text{TM}_2$ za graf butana prikazano je na slici 11. Odnos između indeksa TM_1 i TM_2 i indeksa ${}^*\text{TM}_1$ i ${}^*\text{TM}_2$ uvijek je $\text{TM}_1 (\text{TM}_2) > {}^*\text{TM}_1 ({}^*\text{TM}_2)$, osim u slučaju grafa s jednim čvorom, kada je $\text{TM}_1 = {}^*\text{TM}_1 = 0$ i grafa s dva čvora, kada je $\text{TM}_2 = {}^*\text{TM}_2$.



Slika 8 – Računanje Zagrebačkih indeksa kompleksnosti TM_1 i TM_2 za graph G_2 , koji predstavlja ugljikov kostur butana

Fig. 8 – Computing the Zagreb complexity indices TM_1 i TM_2 for graph G_2 representing the carbon skeleton of butane

Slika 9 – Računanje topologijskoga indeksa kompleksnosti TC za graph G_2 Fig. 9 – Computing the topological complexity index TC for graph G_2 Slika 10 – Računanje topologijskoga indeksa kompleksnosti $TC1$ za graf G_2 Fig. 10 – Computing the topological complexity index $TC1$ for the graph G_2

Opći Zagrebački indeksi

Opće topologijske indekse (*overall topological indices*) uveo je Bonchev.^{27,28} Opći Zagrebački indeksi OM_1 i OM_2 su uvedeni 2001.²⁹ Definirani su na sljedeći način:

$${}^sOM_1 = \sum_s \sum_{i \in V} d(i)d(i) (s) \quad (20)$$

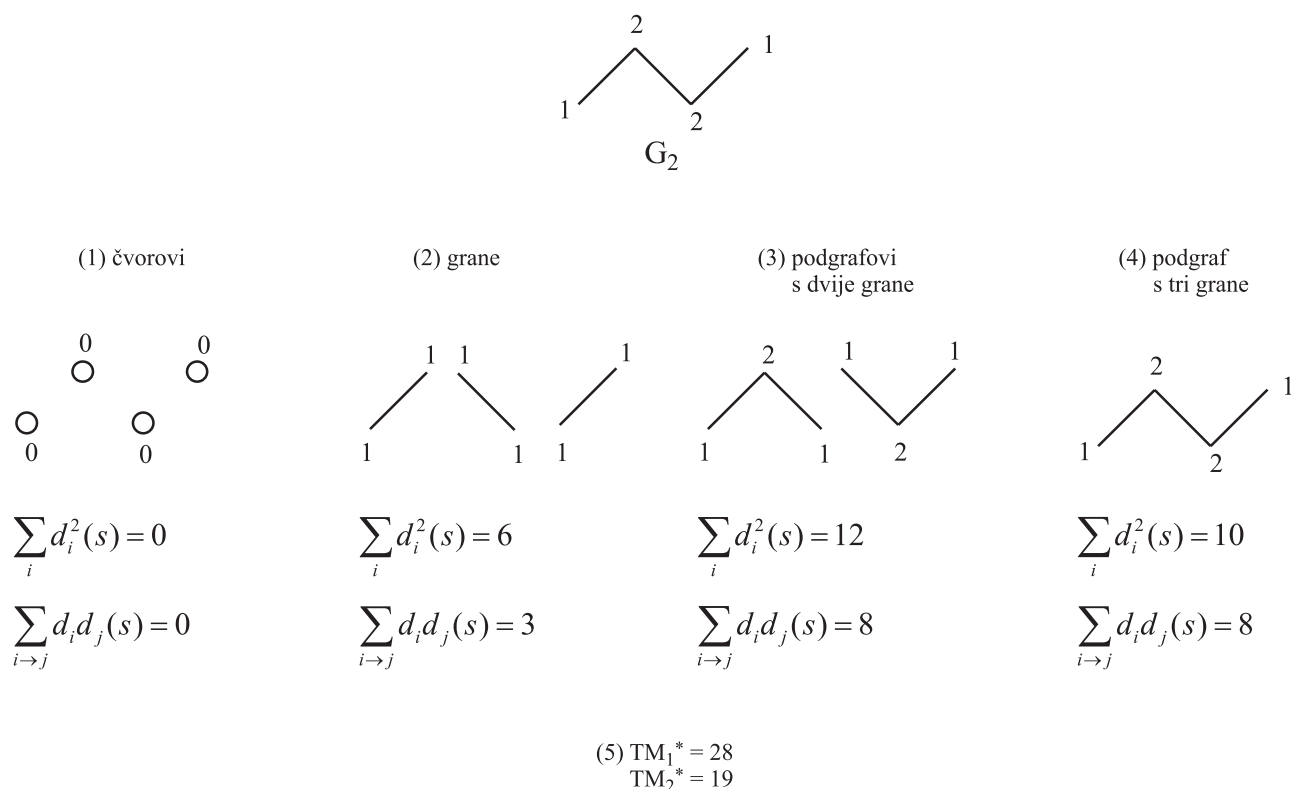
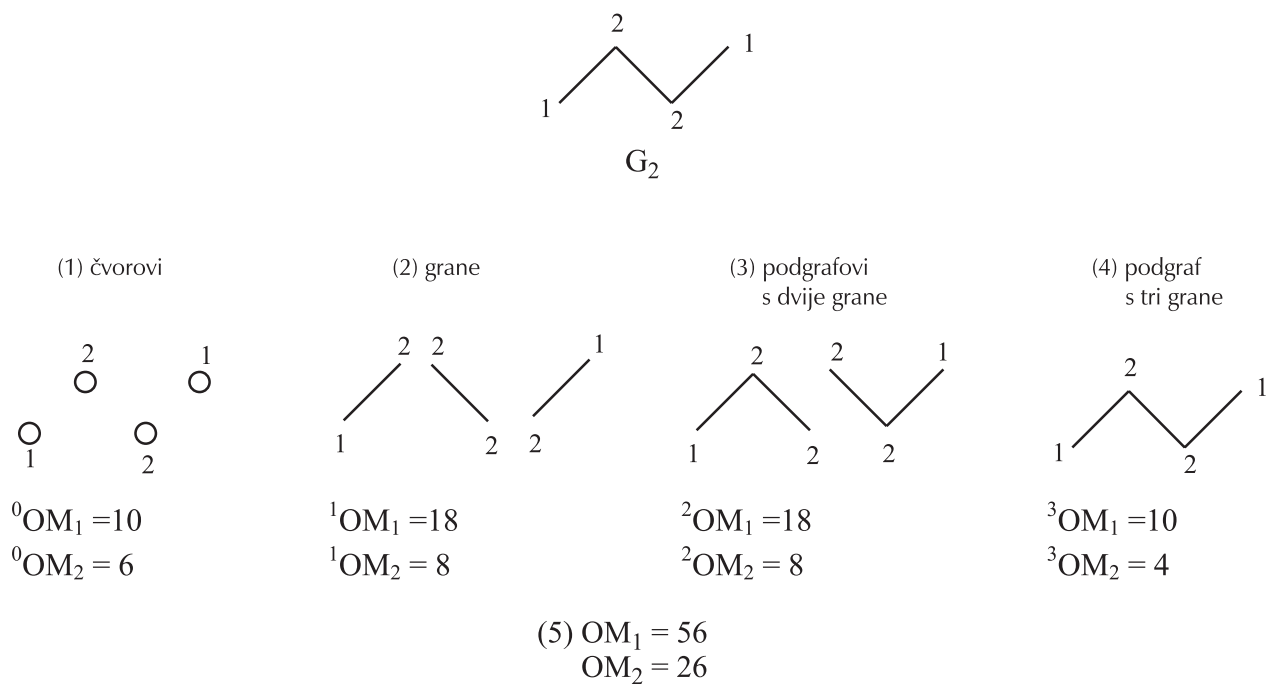
$${}^sOM_2 = \sum_s \prod_{ij \in E} d(i)d(j) (s) \quad (21)$$

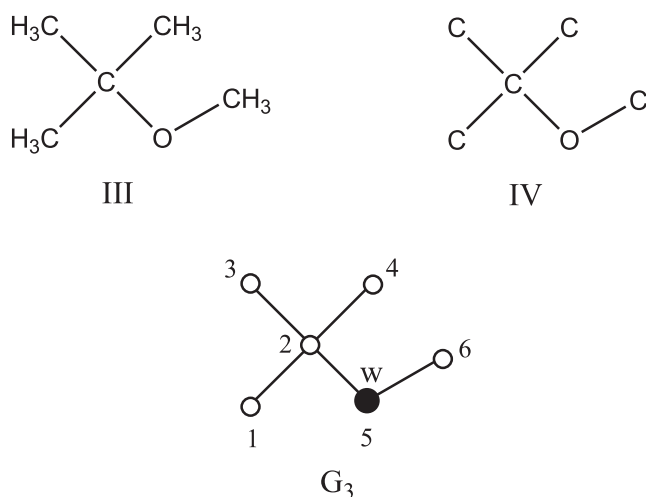
Vidljivo je da je opći prvi Zagrebački indeks OM_1 jednak indeksu TM_1 . Međutim, opći drugi Zagrebački indeks OM_2 nije jednak indeksu TM_2 , jer je u izrazu za računanje OM_2

drugi zbroj u izrazu (18) zamijenjen s produktom. Primjena izraza (20) i (21) ilustrirana je na grafu G_2 i prikazana na slici 12.

Zagrebački indeksi sustava s heteroatomima

Proširenje Zagrebačkih indeksa na sustave s heteroatomima vrlo je jednostavno. Sustave s heteroatomima možemo prikazati pomoću uteženih grafova.^{17,30–32} Na slici 13 je prikazan uteženi graf G_3 , koji služi kao model za molekularni kostur *tert*-butil-metil-eter. U grafu G_3 čvor koji odgovara kisiku u molekuli potamnjen je i dana mu je težina w .

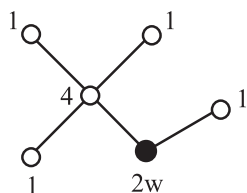
Slika 11 – Računanje modificiranih Zagrebačkih indeksa kompleksnosti TM_1^* i TM_2^* za graf G_2 Fig. 11 – Computing the modified Zagreb complexity indices TM_1^* i TM_2^* for graph G_2 Slika 12 – Računanje općih Zagrebačkih indeksa OM_1 i OM_2 za graf G_2 Fig. 12 – Computing overall Zagreb indices OM_1 i OM_2 for graph G_2



Slika 13 – *tert*-butil-metil-eter (III), njegov kostur (IV) i odgovarajući uteženi molekularni graf G_3 s numeriranim čvorovima. U grafu G_3 čvor, koji odgovara kisiku u molekuli, je zacrnjen i dana mu je težina w .

Fig. 13 – *tert*-butyl methyl ether (III), its skeleton (IV) and the corresponding weighted molecular graph G_3 with labeled vertices. In graph G_3 , the vertex corresponding to the oxygen atom is denoted by the blackened dot and is given weight w .

Na slici 14 dane su valencije čvorova u grafu G_3 . Čvor koji odgovara kisiku u *tert*-butil-metil-eteru dobio je uteženu valenciju. Time je označeno da su grane između toga čvora i susjednih čvorova različite od ostalih grana u grafu G_3 .



Slika 14 – Valencije čvorova u grafu G_3 . Zatamnjeni čvor, koji odgovara kisiku u *tert*-butil-metil-eteru, dobio je uteženu valenciju.

Fig. 14 – The edge-valencies in graph G_3 . The blackened dot corresponding to the oxygen in *tert*-butyl methyl ether, got the weighted valency.

Računanje Zagrebačkih indeksa za utežene grafove se svodi na uvrštavanje valencija čvorova u izraze (1) i (2). Za naš primjer to izgleda ovako:

$$M_1 = 20 + 4w^2 \quad (22)$$

$$M_2 = 12 + 10w \quad (23)$$

Za vrijednost parametra $w = 1$, (22) i (23) reduciraju se na vrijednosti 24 i 22, koje odgovaraju vrijednostima indeksa M_1 i M_2 za 2,2-dimetilbutan.

Postoje različite sheme odabiranja parametra w .^{33–39} Međutim, jednoznačan način odabiranja vrijednosti parametra w nije nađen. Pragmatični pristup odabiru numeričke vrijednosti parametra w je da ga se smatra varijabilnim parametrom, čija optimalna vrijednost daje najbolji model za predviđanje svojstava i aktivnosti određene klase molekula.

Zagrebački indeksi za sustave s heteroatomima mogu se također prikazati i pomoću matrica, koje nazivamo Zagrebačke matrice.¹⁹ Tu ideju da se graf-teorijske matrice rabe kao generatori molekularnih deskriptora prvi je razmatrao Randić sa suradnicima,^{40–42} a kasnije su je razvili Diudea sa suradnicima^{43,44} i drugi.^{9,10}

Zagrebačke indekse definiramo pomoću Zagrebačkih matrica ovako:

$$M_1 = \sum_{i \in V} [ZM]_{ii} \quad (24)$$

$$M_2 = \sum_{ij \in E} [ZM]_{ij} \quad (25)$$

gdje je ZM Zagrebačka matrica, koja je definirana na sljedeći način:⁴⁵

$$[ZM]_{ij} = \begin{cases} [d(i)d(j)] & \text{ako je } i = j \\ [d(i)d(j)] & \text{ako je } i \neq j \\ 0 & \text{ako } i \text{ nije vezan na } j \end{cases} \quad (26)$$

Primjer Zagrebačke matrice za uteženi graf je ZM matrica grafa G_3 .

1	4	0	0	0	0
4	16	4	4	8w	0
0	4	1	0	0	0
0	4	0	1	0	0
0	8w	0	0	4w ²	2w
0	0	0	0	2w	1

Otuda slijede vrijednosti za M_1 i M_2 identične onima prikazanim u izrazima (22) i (23).

Neka svojstva Zagrebačkih indeksa

Zagrebački indeksi posjeduju niz zanimljivih svojstava. Ovdje ćemo navesti samo neka njihova svojstva.

Prvi Zagrebački indeks M_1 je povezan s valencijama čvorova u stablima, koji služe kao modeli alkana, sljedećom relacijom:

$$M_1 = P + 4S + 9T + 16Q \quad (27)$$

gdje su P broj čvorova s valencijom 1, S broj čvorova s valencijom 2, T broj čvorova s valencijom 3 i Q broj čvorova s valencijom 4. Valja znati da u stablima, koja su graf-teorijski prikaz ugljikova kostura alkana, valencije čvorova idu od 1 do 4.

Relacija (27) može se prevesti u relaciju:

$$M_1 = 4V + 2T + 6(Q - 1) \quad (28)$$

pomoću sljedećih relacija:

$$E = V - 1 \quad (29)$$

$$V = P + S + T + Q \quad (30)$$

$$E = (P + 2S + 3T + 4Q)/2 \quad (31)$$

Prvi Zagrebački indeks zadovoljava i sljedeći identitet:⁴⁶

$$M_1 = \sum_{ij \in E} [d(i) + d(j)] \quad (32)$$

Taj rezultat može se lako provjeriti pomoću podataka na slici 4. Relacija (32) je važna jer pokazuje da se i prvi Zagrebački indeks može koncipirati preko zbrajanja određenih doprinosa koje potječu od grana promatranoga grafa. Vrijedi usporediti formule (32) i (2), što će omogućiti uvođenje pojma Zagrebačkih ko-indeksa. O njima poslije u tekstu.

Ako prevedemo neki graf G u odgovarajući linijski graf $L(G)$, tada je indeks M_1 grafa G jednak dvostrukom broju čvorova i grana u linijskome grafu $L(G)$. Linijski graf $L(G)$ nekoga grafa G dobije se tako da se grane u G zamijene čvorovima u $L(G)$.^{18,47} Dva su čvora u $L(G)$ povezana ako su odgovarajuće grane u G susjedne. Na slici 15 prikazujemo konstrukciju linijskoga grafa $L(G_1)$ iz grafa G_1 sa slike 3.

Broj čvorova i grana u nekome grafu G , $V(G)$ i $E(G)$ te u odgovarajućem linijskome grafu $L(G)$, $V[L(G)]$ i $E[L(G)]$, povezani su sljedećim relacijama

$$V[L(G)] = E(G) \quad (33)$$

$$E[L(G)] = (1/2) \sum_{i \in V} d(i) d(i) (G) - E(G) \quad (34)$$

Relaciju (34) možemo transformirati pomoću relacije (1) u:

$$E[L(G)] = M_1/2 - E(G) \quad (35)$$

i otuda slijedi:

$$M_1 = 2 \{E[L(G)] + E(G)\} \quad (36)$$

te uporabom relacije (33) konačno dobijemo:

$$M_1 = 2 \{V[L(G)] + E[L(G)]\} \quad (37)$$

Prvi Zagrebački indeks M_1 jednak je i broju šetnji duljine 2 po grafu G , koje su označene s mw_2 .⁴⁸

$$M_1 = mw_2 \quad (38)$$

Šetnja po grafu je niz čvorova i grana, ali šetnja uvijek počinje i završava čvorom.⁴⁷ Duljina šetnje je broj grana u njoj. Na slici 16 prikazujemo sve šetnje duljine 2 po grafu G_1 .

Prvi Zagrebački indeks M_1 također je povezan i s brojem zatvorenih šetnji duljine 4, koje su označene sa srw_4 .^{49,50}

$$M_1 = (srw_4 + 2 E)/2 \quad (39)$$

Broj šetnji duljine 2, mw_2 , jednak je zbroju svih elemenata u kvadriranoj matrici susjedstva čvorova:

$$M_1 = mw_2 = \sum_{i=1}^V \sum_{j>1}^V ({}^cA^2)_{ij} \quad (40)$$

Relacija (39) se može transformirati u:

$$M_1 = (\sum_{i \in V} ({}^cA^4)_{ii} + 2 E)/2 \quad (41)$$

pomoću relacije:

$$srw_4 = \sum_{i \in V} ({}^cA^4)_{ii} \quad (42)$$

Dok relacija (38) vrijedi općenito, to nije slučaj s relacijama (39) i (41), koje vrijede za grafove bez četveročanih prstena.

Relaciju (41) su modificirali *Liu i Gutman*⁵¹ tako da vrijedi i za grafove koji sadrže četveročlane prstenove C_4 :

$$M_1 = [(\sum_{i \in V} ({}^cA^4)_{ii} + 2 E)/2] - 4 C_4 \quad (43)$$

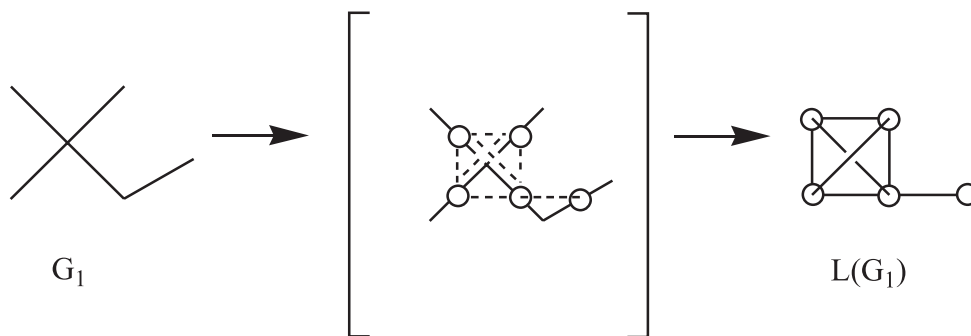
Taj je rezultat poznat još od prve publikacije o Zagrebačkim indeksima,¹ ali očigledno zaboravljen, pa su *Liu i Gutman*⁵¹ ponovili dokaz.

*Braun et al.*⁵² pokazali su da su drugi Zagrebački indeks M_2 i šetnja duljine 3 mw_3 povezani jednostavnom relacijom:

$$M_2 = mw_3/2 \quad (44)$$

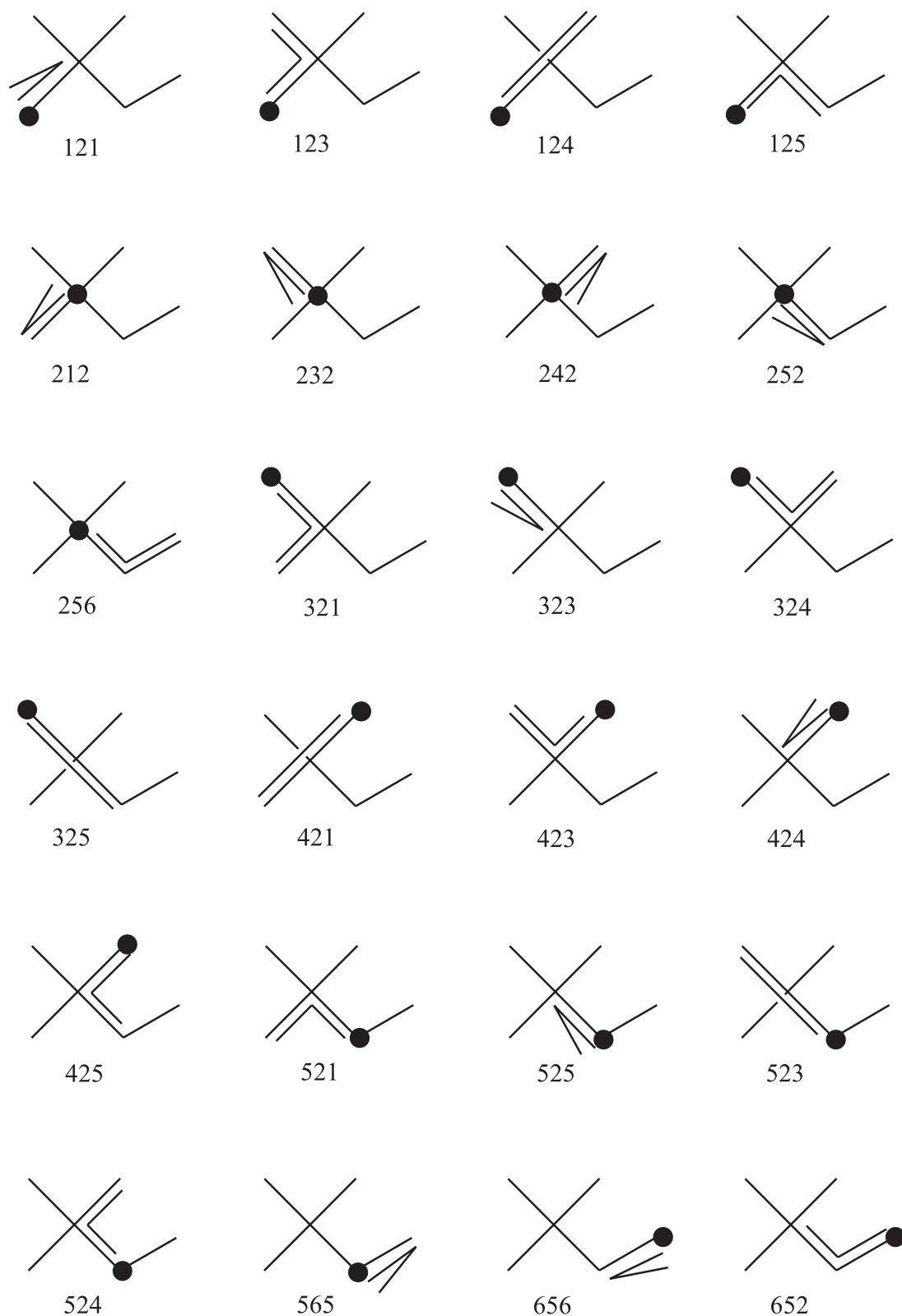
Broj zatvorenih šetnji po grafu je velik čak i za relativno male grafove. Zatvorena šetnja je šetnja koja započinje i završava na istome čvoru.^{18,47} Duljina zatvorene šetnje je broj grana u njoj. Promotrimo kao primjer broj zatvorenih šetnji po grafu G_1 sa slike 3. Matrica ${}^cA^4$ za molekularni graf G_1 je:

$$\begin{bmatrix} 4 & 0 & 4 & 4 & 5 & 0 \\ 0 & 17 & 0 & 0 & 0 & 5 \\ 4 & 0 & 4 & 4 & 5 & 0 \\ 4 & 0 & 4 & 4 & 5 & 0 \\ 4 & 0 & 5 & 5 & 7 & 0 \\ 0 & 5 & 0 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

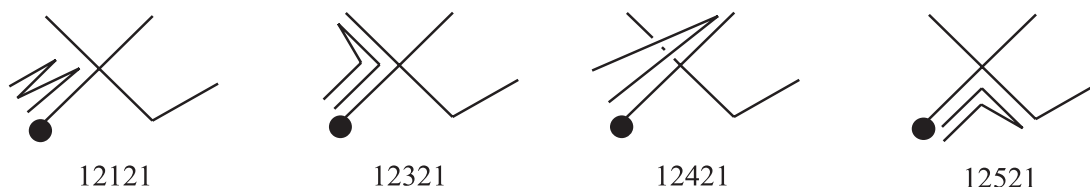


Slika 15 – Konstrukcija linijskoga grafa $L(G_1)$ iz grafa G_1 sa slike 3

Fig. 15 – Construction of line graph $L(G_1)$ from graph G_1 given in Fig. 3



Slika 16 – Sve šetnje duljine 2 po grafu G_1
 Fig. 16 – All walks of the length 2 on graph G_1

Slika 17 – Broj zatvorenih šetnji koje su duljine 4 i koje sve počinju i završavaju na čvoru 1 grafa G_1 Fig. 17 – Number of self-returning walks of length 4 that start and end at vertex 1 of graph G_1

Zbroj dijagonalnih elemenata daje 38 zatvorenih šetnji po grafu G . Na slici 17 dajemo sve zatvorene šetnje, koje su duljine 4 i koje sve počinju i završavaju na čvoru 1 grafa G_1 .

Zagrebački indeksi i neki drugi topološki indeksi

Zagrebački indeksi su povezani s nekim drugim topološkim indeksima. Tako se može pokazati da je prvi Zagrebački indeks M_1 povezan s nekim mnogo starijim indeksima, kao što su npr. Gordon-Scantleburyjev indeks iz 1964.⁵³ i Plattov indeks iz 1947.⁵⁴ Gordon-Scantleburyjev indeks S nekoga grafa G jednak je broju staza duljine 2, p_2 , u grafu:

$$S = p_2 \quad (45)$$

Staza u grafu je niz susjednih grana, koja nikada ne prolazi nekim čvorom više od jedanput.⁵⁵ Duljina staze je broj grana u njoj.

Gordon-Scantleburyjev indeks može se također definirati i pomoću dijagonalnih elemenata kvadrirane matrice susjedstva čvorova:

$$S = (1/2) \sum_{i \in V} (\mathbf{A}^2)_{ii} - E \quad (46)$$

Ako upotrijebimo relaciju (5), tada se relacija (46) može prevesti u sljedeću:

$$S = (1/2) \sum_{i \in V} d(i) d(i) - E \quad (47)$$

ili s pomoću relacije (1) u:

$$S = M_1/2 - E. \quad (48)$$

Usporedba ove relacije s relacijom (35) pokazuje da je vrijednost Gordon-Scantleburyjevog indeksa za neki graf G bez prstenova jednaka broju grana u odgovarajućem linijskome grafu.

Plattov indeks F nekoga grafa jednak je zbroju valencija grana d_g :

$$F = \sum_g d_g \quad (49)$$

Plattov indeks se također može definirati i pomoću kvadrirane matrice susjedstva čvorova:⁵⁶

$$F = \sum_{ij \in E} [(\mathbf{A}^2)_{ii} + (\mathbf{A}^2)_{jj} - 2] \quad (50)$$

Relacija (50) može se reformulirati u:

$$F = \sum_{i \in V} [(\mathbf{A}^2)_{ii} (\mathbf{A}^2)_{ii} - (\mathbf{A}^2)_{ii}] \quad (51)$$

Uporabom sljedećega izraza, poznatoga kao *Lema o rukovanju*, koja potječe od *Leonharda Eulera*:⁵⁷

$$\sum_{i \in V} d(i) = 2 E \quad (52)$$

i relacije (5) dobijemo:

$$F = \sum_{i \in V} [d(i) d(i)] - 2 E. \quad (53)$$

Može se pokazati da su Gordon-Scantleburyjev indeks i Plattov indeks povezani vrlo jednostavnom relacijom:

$$F = 2 S \quad (54)$$

Otuda slijedi da se uporabom relacije (50) dobije jednostavna veza između Plattovog indeksa i prvoga Zagrebačkoga indeksa:

$$F = M_1 - 2E \quad (55)$$

U novije vrijeme mnogo se istražuje nejednakost

$$M_1/V \leq M_2/E \quad (56)$$

na koju je pozornost skrenuo kanadski matematičar *Pierre Hansen*.

Vukičević i Graovac^{58,59} te *Hansen i Vukičević*⁶⁰ pokazali su da relacija (56) vrijedi za sve acikličke grafove, ali ne i općenito za sve grafove. *Caporossi et al.*⁶¹ su nedavno pokazali da relacija (56) vrijedi i za sve grafove s jednim prstenom. Zanimljivo je da je za monocikle vrijedi:

$$M_1/V = M_2/E = 4. \quad (57)$$

Vukičević je 2007. pokazao da relacija:⁶²

$${}^v M_1/V \leq {}^v M_2/E \quad (58)$$

vrijedi za sve grafove i za sve eksponente od 0 do $1/2$, $v \in [0, 1/2]$, a u slučaju molekularnih (kemijskih) grafova vrijedi za sve eksponente od 0 do 1, $v \in [0, 1]$. *Huang et al.*⁶³ su 2010. pokazali su da relacija (58) vrijedi za sve grafove G s eksponentom $v \in [-\infty, 0]$. Taj njihov rezultat uključuje sve *Vukičevićeve* rezultate. Nešto prije su *Zhang i Liu*⁶⁴ pokazali da relacija (58) vrijedi za monocikličke grafove za sve eksponente od 1 do ∞ , $v \in [1, +\infty]$. Taj je rezultat također uključen u rezultat koji su izveli *Huang et al.*⁶³

O istraživanjima u svezi s nejednakostima (56) i (58) *Liu i You* su nedavno objavili pregledni članak.⁶⁵

Zbog sljedećih jednakosti koje postoje između grafa G i njegova linijskoga grafa $L(G)$:

$$V(G) = E[L(G)] \quad (59)$$

$$E(G) = V[L(G)] \quad (60)$$

$$d_e(i)(G) = d(i)[L(G)] \quad (61)$$

izvorni Zagrebački indeksi i reformulirani Zagrebački indeksi su povezani:²⁴

$$EM_1(G) = M_1[L(G)] \quad (62)$$

$$EM_2(G) = M_2[L(G)] \quad (63)$$

Zagrebački ko-indeksi

Kao što je ranije navedeno, iz formula (2) i (32) vidi se da se oba Zagrebačka indeksa mogu dobiti zbrajanjem doprinosa koji potječu od grana promatranog grafa G , to jest od parova čvorova koji su u grafu G susjedni. Došlić⁶⁶ je nedavno predložio *Zagrebačke ko-indekse*, koje je definirao kao zbroj doprinosa koji potječu od parova čvorova koji u grafu G nisu susjedni. Stoga umjesto formula (2) i (32) sada imamo

$$\text{CoM}_1 = \sum_{ij \notin E} [d(i) + d(j)] \quad (64)$$

$$\text{CoM}_2 = \sum_{ij \notin E} d(i)d(j) \quad (65)$$

Zatim je Došlić sa svojim iranskim suradnicima Ashrafijem i Hamzehom odredio ekstremne vrijednosti ovih novih molekularnih deskriptora.⁶⁷ Ova nova klasa molekularnih deskriptora posjeduje niz zanimljivih svojstava. Ovdje navodimo sljedeće:

$$2 M_1 + \text{CoM}_1 = 4 V E \quad (66)$$

$$2 M_2 + \text{CoM}_2 = 4 E^2 \quad (67)$$

gdje je, kao i do sada, V broj čvorova, a E broj grana promatranoga grafa.

Formule za računanje nekih klasa molekula

(i) n -Alkani

$$M_1 = 4(V - 2) + 2 \quad (67)$$

$$M_2 = 4(V - 2) \text{ za } V > 2 \quad (68)$$

(ii) n -Cikloalkani

$$M_1 = M_2 = 4 V \quad (69)$$

Ova jednakost je posljedica da je u cikloalkanima $V = E$.

(iii) Poliaceni

$$M_1 = 26 R - 2 \quad (70)$$

$$M_2 = 33 R - 9 \quad (71)$$

gdje je R broj šesteročlanih prstenova.

(iv) Polifenantreni

$$M_1 = 26 R - 2 \quad (72)$$

$$M_2 = 34 R - 11 \quad (73)$$

Indeks M_1 jednak je u izomernim poliacenima i polifenantrenima. To je posljedica definicije indeksa M_1 , koji ovisi jedino o valencijama atoma u molekuli, pa je za izomerne strukture, kao što su poliaceni i polifenantreni, identičan.

Zaključak

Ima još dosta zanimljivih matematičkih rezultata o Zagrebačkim indeksima i njihovim inačicama,^{68–73} kao npr. o njihovim donjim i gornjim granicama^{74–79} te o Zagrebačkim matricama.⁸⁰ Neki rezultati iznenađuju. Npr. ustanovljeno je da drugi izvorni Zagrebački indeks M_2 uspješnije razlikuje molekularne grafove od drugoga modificiranoga Zagrebač-

koga indeksa mM_2 .⁸¹ Taj je rezultat neočekivan jer M_2 indeksi pripadaju skupu prirodnih brojeva, a mM_2 indeksi skupu racionalnih brojeva. Na kraju ističemo da su izvorni Zagrebački indeksi vrlo jednostavni molekularni deskriptori, ali trebalo se dosjetiti te jednostavnosti.

ZAHVALA

Projekt o Zagrebačkim indeksima je od početka podržavan od Ministarstva znanosti, obrazovanja i športa Republike Hrvatske.

Literatura References

1. I. Gutman, N. Trinajstić, *Chem. Phys. Lett.* **17** (1972) 535.
2. I. Gutman, B. Ruščić, N. Trinajstić, C. F. Wilcox, Jr., *J. Chem. Phys.* **62** (1975) 3399.
3. A. T. Balaban, I. Motoc, L. Bonchev, O. Mekeyan, *Topics Curr. Chem.* **114** (1983) 21.
4. S. C. Basak, B. D. Gute, G. D. Grunwald, *Croat. Chem. Acta* **69** (1996) 1159.
5. S. Nikolić, G. Kovačević, A. Miličević, N. Trinajstić, *Croat. Chem. Acta* **76** (2003) 113.
6. A. T. Balaban, urednik, *From Chemical Topology to Three-Dimensional Geometry*, Plenum, New York, 1997.
7. J. Devillers, A. T. Balaban, urednici, *Topological Indices and Related Descriptors in QSAR and QSPR*, Gordon & Breach, Amsterdam, 1999.
8. M. Karelson, *Molecular Descriptors in QSAR/QSPR*, Wiley-Interscience, New York, 2000.
9. R. Todeschini, V. Consonni, *Handbook of Molecular Descriptors*, Wiley-VCH, Weinheim, 2000.
10. R. Todeschini, V. Consonni, *Molecular Descriptors for Chemoinformatics*, Wiley-VCH, Weinheim, 2009.
11. O. Ivanciuc, J. Devillers, u: *Topological Indices and Related Descriptors in QSAR and QSPR*, J. Devillers, A. T. Balaban, urednici, Gordon & Breach, Amsterdam, 1999., str. 779.
12. I. Gutman, K. C. Das, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **50** (2004) 83.
13. K. C. Das, I. Gutman, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **52** (2004) 103.
14. B. Zhou, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **52** (2004) 113.
15. K. C. Das, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **63** (2010) 433.
16. S. C. Basak, G. D. Grunwald, G. J. Niemi, u: *From Chemical Topology to Three Dimensional Geometry*, A. T. Balaban, urednik, Plenum, New York, 1997., str. 73.
17. I. Gutman, N. Trinajstić, *Kem. Ind.* **22** (1973) 75.
18. D. Veljan, *Kombinatorna i diskretna matematika*, Algoritam, Zagreb, 2001. str. 297.
19. D. Janežič, A. Miličević, S. Nikolić, N. Trinajstić, *Graph-Theoretical Matrices in Chemistry*, University of Kragujevac, Kragujevac, 2007.
20. D. Bonchev, *J. Mol. Graphics Modell.* **20** (2001) 65.
21. A. Miličević, S. Nikolić, *Croat. Chem. Acta* **77** (2004) 97.
22. M. Randić, *J. Am. Chem. Soc.* **97** (1975) 6609.
23. X. Li, I. Gutman, *Mathematical Aspects of Randić-Type Molecular Structure Descriptors*, Sveučilište u Kragujevcu, Kragujevac, 2006.

24. A. Miličević, S. Nikolić, N. Trinajstić, *Mol. Diversity* **8** (2004) 393.
25. S. Nikolić, N. Trinajstić, I. M. Tolić, G. Rücker, C. Rücker, u: *Complexity – Introduction and Fundamentals*, D. Bonchev, D. H. Rouvray, urednici, Taylor & Francis, London, 2003, str. 29–89.
26. D. Bonchev, *SAR QSAR Environ. Res.* **7** (1997) 23.
27. D. Bonchev, u: *Topological Indices and Related Descriptors in QSAR and QSPR*, J. Devillers, A. T. Balaban, urednici, Gordon & Breach, Amsterdam, 1999., str. 361.
28. D. Bonchev, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **40** (2000) 934.
29. D. Bonchev, N. Trinajstić, *SAR QSAR Environ. Res.* **12** (2001) 213.
30. R. B. Mallion, A. J. Schwenk, N. Trinajstić, *Croat. Chem. Acta* **46** (1974) 171.
31. A. Graovac, O. E. Polansky, N. Trinajstić, N. Tyutyulkov, *Z. Naturforsch.* **29a** (1974) 1696.
32. R. B. Mallion, A. J. Schwenk, N. Trinajstić, u: *Recent Advances in Graph Theory*, urednik M. Fiedler, Academia, Prague, 1975, str. 345.
33. A. T. Balaban, *Chem. Phys. Lett.* **80** (1982) 399.
34. A. T. Balaban, *Pure Appl. Chem.* **55** (1983) 199.
35. M. Barysz, G. Jashari, R. S. Lall, V. K. Srivastava, N. Trinajstić, u: *Chemical Applications of Topology and Graph Theory*, urednik R. B. King, Elsevier, Amsterdam, 1983, str. 222.
36. A. T. Balaban, *MATCH Commun. Math. Chem. Comput. Sci.* **21** (1986) 115.
37. A. T. Balaban, O. Ivanciuc, u: *MATH/CHEM/COMP 1988*, urednik A. Graovac, Elsevier, Amsterdam, 1989, str. 193.
38. O. Ivanciuc, T. Ivanciuc, A. T. Balaban, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **38** (1998) 395.
39. O. Ivanciuc, T. Ivanciuc, A. T. Balaban, u: *Topological Indices and Related Descriptors in QSAR and QSPR*, urednici J. Devillers i A. T. Balaban, Grodon & Breach, Amsterdam, 1999, str. 169.
40. M. Randić, X. Guo, T. Oxley, H. Krishnapyan, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **33** (1993) 709.
41. M. Randić, X. Guo, T. Oxley, H. Krishnapyan, L. Naylor, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **34** (1994) 361.
42. M. Randić, *Croat. Chem. Acta* **67** (1994) 415.
43. M. V. Diudea, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **35** (1997) 169.
44. M. V. Diudea, O. Orsu, *Ind. J. Chem. A* **41** (2003) 1283.
45. D. Janežič, A. Miličević, S. Nikolić, N. Trinajstić, D. Vukičević, *Croat. Chem. Acta* **80** (2007) 541.
46. B. Zhou, N. Trinajstić, *J. Math. Chem.* **46** (2009) 1252.
47. N. Trinajstić, *Chemical Graph Theory*, CRC, Boca Raton, FL, 1992., II. revidirano izdanje.
48. I. Gutman, C. Rücker, G. Rücker, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **41** (2001) 739.
49. D. Bonchev, X. Liu, D. J. Klein, *Croat. Chem. Acta* **66** (1993) 142.
50. D. Bonchev, *J. Mol. Struct. (Theochem)* **336** (1995) 137.
51. B. Liu, I. Gutman, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **57** (2001) 617.
52. J. Braun, A. Kerber, M. Meringer, C. Rücker, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **54** (2005) 163.
53. M. Gordon, G. R. Scantlebury, *Trans Faraday Soc.* **60** (1964) 604.
54. J. R. Platt, *J. Chem. Phys.* **15** (1947) 419.
55. F. Harary, *Graph Theory*, Addison-Wesley, Reading, MA, 1971, drugo izdanje, str. 13.
56. M. Barysz, D. Plavšić, N. Trinajstić, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **19** (1986) 89.
57. L. Euler, *Commentarii Academiae Scientiarum Imperialis Petropolitanae* **8** (1736) 128.
58. D. Vukičević, A. Graovac, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **57** (2007) 587.
59. D. Vukičević, A. Graovac, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **60** (2008) 37.
60. P. Hansen, D. Vukičević, *Croat. Chem. Acta* **80** (2007) 165.
61. G. Caporossi, P. Hansen, D. Vukičević, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **63** (2010) 441.
62. D. Vukičević, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **57** (2007) 633.
63. Y. Huang, B. Liu, M. Zhang, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **63** (2010) 453.
64. M. Zhang, B. Liu, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **63** (2010) 461.
65. B. Liu, Z. You, u: *Novel Molecular Structure Descriptors – Theory and Applications I* urednici I. Gutman i B. Furtula, Univ. Kragujevac, Kragujevac, 2010, str. 227.
66. T. Došlić, *Ars Mathematica Contemporanea* **1** (2008) 66.
67. A. R. Ashrafi, T. Došlić, A. Hamzeh, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **65** (2011) 85.
68. I. Gutman, K. C. Das, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **50** (2004) 83.
69. K. C. Das, I. Gutman, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **52** (2004) 103.
70. I. Gutman, B. Furtula, A. A. Toropov, A. P. Toropova, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **53** (2005) 225.
71. S. Zhang, W. Wang, T. C. E. Cheng, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **56** (2006) 579.
72. D. Vukičević, S. M. Rajtmajer, N. Trinajstić, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **60** (2008) 65.
73. B. Zhou, N. Trinajstić, *J. Math. Chem.* **47** (2010) 210.
74. M. Liu, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **63** (2010) 425.
75. B. Zhou, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **52** (2004) 113.
76. B. Zhou, I. Gutman, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **54** (2005) 233.
77. B. Liu, I. Gutman, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **55** (2006) 439.
78. B. Zhou, D. Stevanović, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **56** (2006) 571.
79. Y. Gou, Y. Du, Y. Wang, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **63** (2010) 469.
80. D. Vukičević, S. Nikolić, N. Trinajstić, *J. Math. Chem.* **45** (2009) 538.
81. D. Vukičević, N. Trinajstić, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **53** (2005) 111.

SUMMARY

About the Zagreb Indices

N. Trinajstić,^a S. Nikolić,^a and A. Miličević^b

The original Zagreb indices and some of their variants, such as the modified Zagreb indices, variable Zagreb indices, reformulated original Zagreb indices, reformulated modified Zagreb indices, Zagreb indices as complexity indices, general Zagreb indices, Zagreb indices for heterocyclic systems, Zagreb co-indices, are outlined. Some interesting properties of the Zagreb indices, depending on the structure of molecular (chemical) graphs, are mentioned. Zagreb indices of line graphs and their connection with certain walks on graphs are discussed. The relationships between the Zagreb indices and some of the earliest molecular descriptors such as the Platt index (introduced in 1947) and Gordon-Scantlebury index (introduced in 1964) are presented. So-called Zagreb co-indices are briefly mentioned. Analytical formulas for computing Zagreb indices of several homologous structures are also given.

^a *The Rugjer Bošković Institute, Bijenička 54,
HR-10 001 Zagreb, Croatia*

^b *Institute for Medical Research and Occupational Health,
Ksaverska cesta 2, HR-10 1001 Zagreb, Croatia*

^c *Faculty of Science Kragujevac, 34 000 Kragujevac,
P. O. Box 60, Serbia*

Received May 28, 2010

Accepted September 17, 2010